

Structura moleculară.

§1.1. Formule chimice: formula brută, formula moleculară, formula structurală

Concepte generale

Observabilă	Categorie superioară	Caracterizare
Univers	-	Întreg spațiul de observare
Materie	Univers	Întreg spațiul de observabile
Energie radiantă	Materie	au o viteză comparabilă cu viteza luminii
Radiații β , γ , etc.	Energie radiantă	Se diferențiază prin proprietăți
Corpuri	Materie	au o viteză mult mai mică decât viteza luminii
Ansambluri de materiale	Corpuri	pot avea o compoziție (chimică) variabilă și discontinuă
Materiale	Ansambluri de materiale	pot avea compoziție (chimică) variabilă dar nu discontinuă
Amestecuri de substanțe	Materiale	au compoziție definită
Substanțe (omogene)	Amestecuri de substanțe	compoziție (chimică) constantă
Substanțe eterogene	Amestecuri de substanțe	compoziție (chimică) variabilă
Soluție	Amestecuri de substanțe	stare de agregare solidă sau lichidă
Aliaj	Soluție	amestecuri de metale în stare de agregare solidă sau lichidă
Compus chimic	Substanțe (omogene)	Au o structură chimică definită și unică

Cantitatea de substanță

Molul reprezintă cantitatea de substanță care conține atâtea specii (atomi, molecule, ioni, unități de formule, electroni sau alte entități specificate) câți atomi există în 12 g din izotopul ^{12}C adică $N_A \approx 6.023 \cdot 10^{23}$ electroni/mol, N_A fiind numărul lui Avogadro. Numărul de moli, notat cu n , este dat de relația $n = N/N_A$ și reprezintă cantitatea de substanță ce conține N entități specificate. **Consecință.** Proprietățile sunt clasificate în extensive (depind de dimensiunea probei; exemple: masa și volumul) și intensive (independente de dimensiunea probei; exemple: temperatura, densitatea, presiunea). Proprietățile molare sunt mărimi intensive și se calculează pe baza proprietăților extensive cu formula: $X_m = X/n$, unde X este o proprietate extensivă iar n este numărul de moli din probă și X_m este proprietatea molară asociată proprietății extensive X .

Exemple de mărimi intensive:

- ÷ V_m - volum molar - proprietate intensivă asociată proprietății extensive volum V ;
- ÷ M - masa molară - masa probei împărțită la cantitatea de substanță: $M = m/n$, $[M] = \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$;
- ÷ C_m - concentrația molară sau molaritatea unui solvat - numărul de moli de substanță dizolvată într-un litru de soluție: $c_m = n/V_s$, $[c_m] = \text{mol} \cdot \text{l}^{-1} = M$;
- ÷ m_m - concentrația molală sau molalitatea - numărul de moli de substanță dizolvată raportată la masa de solvent folosit pentru a prepara soluția: $m_m = n/m_s$, $[m_m] = \text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$;

Exemple de mărimi extensive:

- ÷ $c_p(m_j)$ - concentrația procentuală de masă - numărul de unități (g, kg) din substanța j considerată, conținut în 100 de unități (100g, 100kg) din amestec: $c_p(m_j) = m_j \cdot 100 / \sum_j m_j$ [%];
- ÷ $c_p(V_j)$ - concentrația procentuală de volum - volum de substanță pură se află în 100 ml (100 cm^3) de amestec: $c_p(V_j) = V_j \cdot 100 / \sum_j V_j$ [%];

Fracția molară x_j a componentului j dintr-un amestec: $x_j = n_j / \sum_j n_j$ este o mărime intensivă.

Demonstrație: fie un amestec P cu compoziția exprimată prin raportul numărului de molecule din fiecare component j în amestec pentru: $\alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_j$; (cum ar fi pentru $\text{C}_2\text{O}_4\text{H}_2$, $\alpha_1 : \alpha_2 : \alpha_3 = 2 : 4 : 2 = 1 : 2 : 1 = \dots$) și numărul de moli n .

$$x_j = \frac{n_j}{\sum_j n_j} = \frac{\frac{N_j}{N_A}}{\sum_j \frac{N_j}{N_A}} = \frac{N_j}{\sum_j N_j} = \frac{N \cdot \alpha_j / \sum_j \alpha_j}{\sum_j N \cdot \alpha_j / \sum_j \alpha_j} = \frac{\alpha_j}{\sum_j \alpha_j}$$

Expresia rezultată nu depinde decât de compoziția dată de proporție și nu depinde de numărul de moli sau molecule implicate așa că este o mărime intensivă.

Densitatea ρ unui amestec $\rho = \sum_j m_j / \sum_j V_j$ este o mărime intensivă. Demonstrație: se pleacă de la formula de definiție a densității, în care se explicitează masele:

$$\rho = \frac{\sum_j n_j M_j}{\sum_j V_j} = \frac{\sum_j n \cdot x_j M_j}{\sum_j V_j} = \frac{\sum_j x_j M_j}{\sum_j V_j / n} = \frac{\sum_j x_j M_j}{V_m}$$

În expresia rezultată intervin numai mărimi intensive (x_j , M_j și V_m) și atunci definește o mărime intensivă.

Numere cuantice

"Câte numere cuantice sunt necesare pentru a descrie un sistem dat?" - nu are un răspuns universal; pentru fiecare sistem trebuie găsit răspunsul pentru a permite o analiză completă a sistemului. În mod evident un sistem cuantificat necesită cel puțin un număr cuantic.

Elementele chimice se pot descrie pe baza electronilor cu ajutorul a patru numere cuantice:

- ÷ n - număr cuantic principal (strat): $n = 0, 1, \dots$;
- ÷ l - număr cuantic secundar (substrat): $l = 0..n-1$;
- ÷ m - număr cuantic terțiar (orbital): $m = -l..l$;
- ÷ s - număr cuantic cuaternar (spin): $s = \pm 1/2$;

Exemplu (Hg - Z=80 - număr atomic):

Învelișul de electroni	Ordinea de
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$	completare (energii)
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 5g^{18} 6s^2$	aparitie (cuantic)

- ÷ $n=1$
 - $l=0$
 - $m=0$
 - $s=\pm 1/2 \rightarrow 1s^2$
- ÷ $n=2$
 - $l=0$
 - $m=0$
 - $s=\pm 1/2 \rightarrow 2s^2$
 - $l=1$
 - $m=-1,0,1$
 - $s=\pm 1/2 \rightarrow 2p^6$
- ÷ $n=3$
 - $l=0 \rightarrow 3s^2$
 - $l=1 \rightarrow 3p^6$
 - $l=2$
 - $m=-2,-1,0,1,2$
 - $s=\pm 1/2 \rightarrow 3d^{10}$
- ÷ $n=4$
 - $l=0 \rightarrow 4s^2$
 - $l=1 \rightarrow 4p^6$
 - $l=2 \rightarrow 4d^{10}$
 - $l=3$
 - $m=-3,-2,-1,0,1,2,3$
 - $s=\pm 1/2 \rightarrow 4f^{14}$
- ÷ etc.

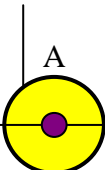
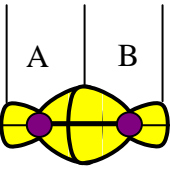
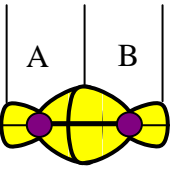
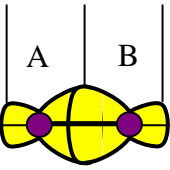
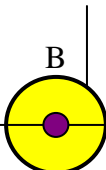
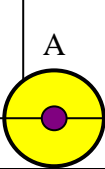
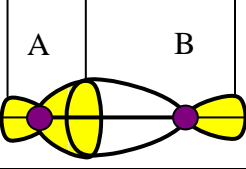
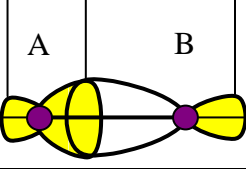
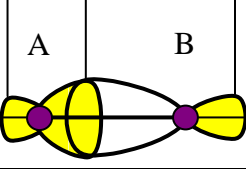
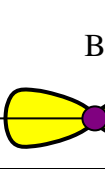
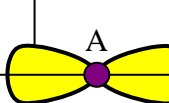
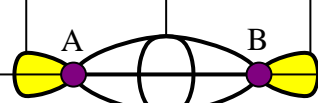
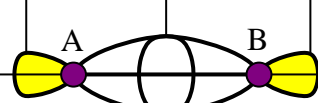
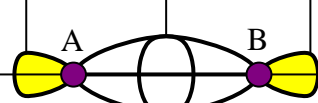
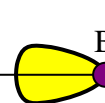
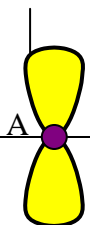
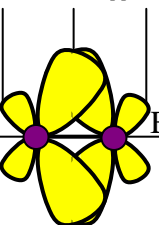
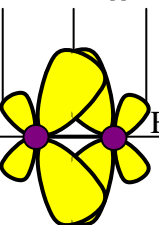
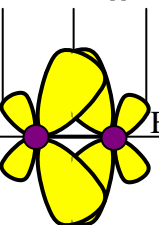
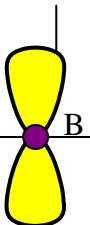
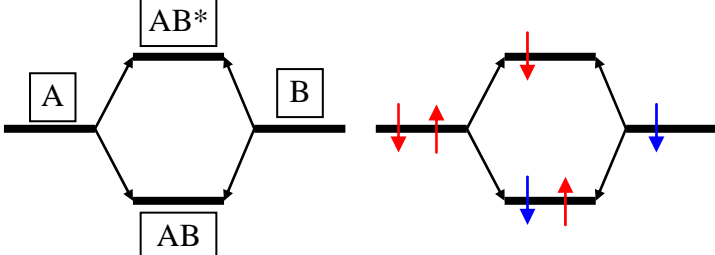
Valența

- ÷ Este o proprietate atomică (altă proprietate atomică: numărul atomic Z);
- ÷ Bazată pe tendința elementelor de a-și "stabiliza" structura de electroni;
 - Structuri "stabile": $s^2, p^3, p^6, d^5, d^{10}$, etc.
- ÷ Exemplu - C - carbon (Z=6): $1s^2, 2s^2, 2p^2 \rightarrow 1s^2, 2s^2, 2p^6 :C^4-$ (CH_4)
- ÷ Valențe principale ("preferate"), secundare ("rare") și elementale (molecule "homoatomice")
 - H: +1 (H_2, HCl); -1 (LiH, BeH_2); 0 (H_2)
 - O: -2 (H_2O, CaO); -1 ($NaO-ONa$); 0 (O_2)
 - Cl: -1 (HCl); +1 ($HClO$); +3 ($HClO_2$); +5 ($HClO_3$); +7 ($HClO_4$)
- ÷ http://vl.academicdirect.ro/general_chemistry/periodic_system/
 - "main" → valențe principale
 - "others" → valențe secundare

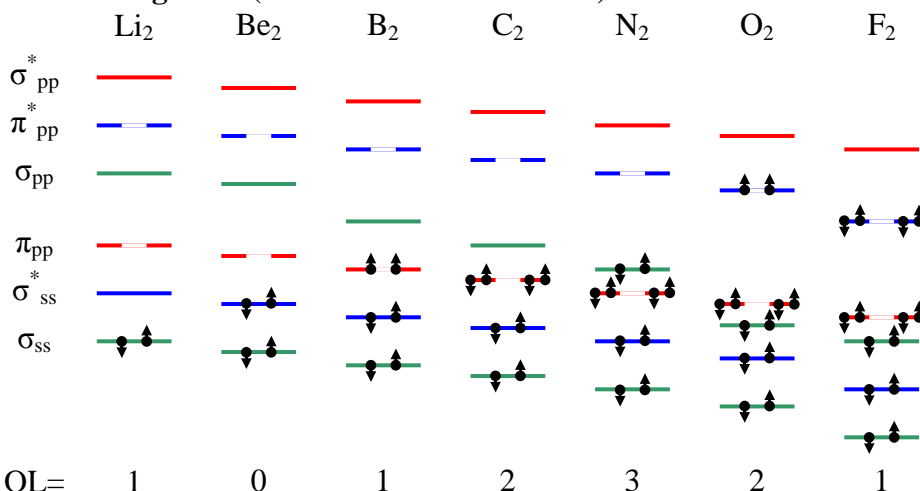
Combinății chimice

- ÷ Homoatomice și heteroatomice;
- ÷ Binare, ternare, cuaternare, etc.;
- ÷ Exemple: O_2, O_3, H_2O (combinație binară!), H_2SO_4 ;
- ÷ Legături covalente - punere în comun de electroni; cazuri limită:
 - Legătura metalică $Me_n, n \rightarrow \infty$;
 - Legătura ionică $AB \rightarrow A^+B^-$ (ex. $HCl \rightarrow H^+Cl^-$);
 - Coordinative $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^0 4s^2 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

Hibridizare


orbită s	orbită σ_{ss}^*	orbită σ_{ss}	orbită σ_{ss}^*	orbită s	$s + s \rightarrow \sigma + \sigma^*$
					
orbită s	orbită σ_{sp}^*	orbită σ_{sp}	orbită σ_{sp}^*	orbită p	$s + p \rightarrow \sigma + \sigma^*$
					
orbită p	orbită σ_{pp}^*	orbită σ_{pp}	orbită σ_{pp}^*	orbită p	$p + p \rightarrow \sigma + \sigma^*$
					
orbită p	orbită π_{pp}^*	orbită π_{pp}	orbită π_{pp}^*	orbită p	$p + p \rightarrow \pi + \pi^*$
					
					2n orbitali atomici ↓ 2n orbitali moleculari (hibridi)

Ordin de legătură (→ stabilitate moleculară)



Ordin de legătură = diferența între numărul de orbitali "de legătură" ocupați și numărul de orbitali "de antilegătură" ocupați

Ordin de legătură fracționar

÷ Ex: C-C în C₆H₆ () - OL = 3/2;

Electronegativitate

÷ Proprietate chimică care descrie abilitatea unui atom (sau a unui grup de atomi) de a atrage electroni către el; Este o mărime relativă!

÷ Scări de electronegativitate:

Electronegativități Pauling																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.1																	He
2	Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	Ne
3	Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	Ar
4	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr
5	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe
6	Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	Rn

Electronegativități Pauling revizuite																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 2.90
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.60	Mo 2.16	Tc 1.90	Ru 2.20	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10	I 2.66	Xe
6	Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.27	Hf 1.30	Ta 1.50	W 2.36	Re 1.90	Os 2.20	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 2.04	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00	At 2.20	Rn

Electronegativități Sanderson																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.31																	He
2	Li 0.86	Be 1.61											B 1.88	C 2.47	N 2.93	O 3.46	F 3.92	Ne
3	Na 0.85	Mg 1.42											Al 1.54	Si 1.74	P 2.16	S 2.66	Cl 3.28	Ar 3.92
4	K 0.74	Ca 1.06	Sc 1.09	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 1.86	Ga 2.10	Ge 2.31	As 2.53	Se 2.76	Br 2.96	Kr 3.17
5	Rb 0.70	Sr 0.96	Y 0.98	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd 1.73	In 1.88	Sn 2.02	Sb 2.19	Te 2.34	I 2.50	Xe 2.63
6	Cs 0.69	Ba 0.93	La 0.92	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg 1.92	Tl 1.96	Pb 2.01	Bi 2.06	Po	At	Rn

Electronegativități Allred Rochow																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.20																	He
2	Li 0.97	Be 1.47											B 2.01	C 2.50	N 3.07	O 3.5	F 4.1	Ne
3	Na 1.01	Mg 1.23											Al 1.47	Si 1.74	P 2.06	S 2.44	Cl 2.83	Ar
4	K 0.91	Ca 1.04	Sc 1.20	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 1.66	Ga 1.82	Ge 2.02	As 2.20	Se 2.48	Br 2.74	Kr
5	Rb 0.89	Sr 0.99	Y 1.11	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd 1.46	In 1.49	Sn 1.72	Sb 1.82	Te 2.01	I 2.21	Xe
6	Cs 0.86	Ba 0.97	La 1.08	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg 1.44	Tl 1.44	Pb 1.55	Bi 1.67	Po	At	Rn

Stări de oxidare "principale"																		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H +1																	He 0
2	Li +1	Be +2											B +3	C +4	N +3 +5	O +2	F -1	Ne 0
3	Na +1	Mg +2											Al +3	Si +2 +4	P +5	S -2 0 +6	Cl -1 +7	Ar 0
4	K +1	Ca +2	Sc +2 +3	Ti +4	V +3 +4 +5	Cr +3	Mn +2	Fe +2 +3	Co +2	Ni +2	Cu +2	Zn +2	Ga +3	Ge +2 +4	As +3 +5	Se +4 +6	Br -1 +5	Kr 0 +2
5	Rb -1 +1	Sr +2	Y +3	Zr +4	Nb +5	Mo +6	Tc +4 +5 +7	Ru +3	Rh +3	Pd +2	Ag +1	Cd +2	In +3	Sn +2 +4	Sb +3 +5	Te +4	I -1	Xe 0 +2 +4
6	Cs -1 +1	Ba +2	La +3	Hf +4	Ta +5	W +4 +6	Re +3 +4 +5	Os +4	Ir +3 +4	Pt +4	Au +3	Hg +2	Tl +1	Pb +2 +4	Bi +3	Po +4	At -1 +1 +3	Rn 0 +2

Aplicație: electronegativitatea de grup

Metoda de aproximare "super-atom"

$$E_G = \frac{\sum_A V_A E_A}{\sum V_A}$$

Exemple (folosind scara Pauling revizuită):

Grup	Calcul	Rez.	Ref: Hanqing WU. 1997. <i>Re-propose Organic and Inorganic Property Values and Group Electronegativity for Drug and Biological Molecules and Their Calculation through JavaScript and Application in QSAR Studies</i> . First International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (ECSOC-1), www.mdpi.org/ecsoc/, September 1-30, 1997
-CH ₃	$(4 \cdot 2.55 + 3 \cdot 2.20) / (4 + 3)$	2.40	
-CHO	$(4 \cdot 2.55 + 1 \cdot 2.20 + 2 \cdot 3.44) / (4 + 1 + 2)$	2.75	
-OH	$(2 \cdot 3.44 + 1 \cdot 2.20) / (2 + 1)$	3.03	
-OCH ₃	$(2 \cdot 3.44 + 1 \cdot 2.40) / (2 + 1)$	3.09	

Metoda Diudea-Silaghi

$E_{V,k} = \sqrt[k + \sum_j b_{v,j}]{(E_A)_V^k \prod_j (E_A)_j^{b_{v,j}}}$, $b_{v,j}$ este ordinul de legătură al lui v cu j, k - numărul de legături ale vârfului V al grupului G către alți atomi

Exemple (folosind scara Sanderson):

Grup	Calcul	Rez.	Ref: Mircea V. DIUDEA, Ioan SILAGHI-DUMITRESCU, 1989. <i>Valence group electronegativity as a vertex discriminator</i> . Revue Roumaine de Chimie 34(5):1175-1182.
-CH ₃	${}^{1+3}\sqrt{(2.47)^1 \cdot ((2.31)^1 (2.31)^1 (2.31)^1)}$	2.349	
-CHO	${}^{1+3}\sqrt{(2.47)^1 \cdot ((2.31)^1 (3.46)^2)}$	2.875	
-OH	${}^{1+1}\sqrt{(3.46)^1 \cdot ((2.31)^1)}$	2.827	
-OCH ₃	${}^{1+1}\sqrt{(3.46)^1 \cdot ((2.349)^1)}$	2.851	

Alte metode

Grup	Ref1	Ref2	Ref3	Ref4	Ref5	Ref6	Ref7	Ref1: Leah D. GARNER-O'NEALE, Alcindor F. BONAMY, Terry L. MEEK, Brian G. PATRICK, 2003. Calculating group electronegativities using the revised Lewis-Langmuir equation. <i>Journal of Molecular Structure: THEOCHEM</i> 639(1-3):151-156. Ref2: Steven G. BRATSCHE, 1988. Revised mulliken electronegativities II. Applications and limitations. <i>Journal of Chemical Education</i> 65(3):223-227. Ref3: James E. HUHEEY, 1965. The electronegativity of groups. <i>Journal of Physical Chemistry</i> 69(10):3284-3291. & James E. HUHEEY, 1966. The electronegativity of multiply bonded groups. <i>Journal of Physical Chemistry</i> 70(7):2086-2092. Ref4: Naoki INAMOTO and Shozo MASUDA, 1982. Calculation of new inductive substituent parameter (τ) for group and the application. <i>Chemistry Letters</i> 11(7):1007-1010. Ref5: Robert Thomas SANDERSON, 1976. <i>Chemical Bonds and Bond Energy</i> (second ed.). Academic Press, New York (1976). Ref6: Qian L. XIE, Hongmei Mei SUN, Guirong XIE, Jiaju ZHOU, 1995. An iterative method for calculation of group electronegativities. <i>Journal of Chemical Information and Computer Sciences</i> 35(1):106-109. Ref7: Russell Jaye BOYD, Susan L. BOYD, 1992. Group electronegativities from the bond critical point model. <i>Journal of the American Chemical Society</i> 114(5):1652-1655.
-OF	3.51		4.14				3.60	
-ONO	3.44		4.43					
-OCl	3.42	3.23	3.73				3.58	
-OCN	3.41	3.35	4.66				3.57	
-OH	3.36	2.82	3.51	3.49	2.81	3.48	3.55	
-NO ₂	3.29		4.83	3.42	3.29	3.63		
>NH	3.04						3.09	
-NCO	2.98	3.37		3.55			3.18	
=NH	2.96					3.31		
-NCS	2.91	3.09	4.17	3.51	2.68	3.29	3.22	
-NH ₂	2.88	2.47	2.61	2.99	2.49	3.05	3.12	
>S(=O) ₂	2.83		4.40					
>S=O	2.75		4.00					
-CF ₃	2.71	3.47	3.46			3.18	2.71	
>C=O	2.71		3.72					
-COOH	2.66	3.04	3.54	2.82	2.86	2.73	2.63	
-CONH ₂	2.63			2.73		2.69	2.61	
-COCl	2.63			2.73			2.66	
-CN	2.60	3.32	3.84	3.21	2.68	3.10	2.69	
-CHO	2.60	2.93		2.87	2.68	2.85	2.60	
-CCl ₃	2.56	2.95	2.84	2.66		2.68	2.70	
-SCN	2.54	3.10	3.91		2.68	2.89	2.70	
-SH	2.51	2.50	2.32	2.62	2.48	2.56	2.65	
-C(CH ₃)	2.50		2.29					
-CH ₃	2.47	2.31	2.27	2.47		2.47	2.55	
>PH	2.27							
-PH ₂	2.24	2.27	2.13	2.19			2.17	
-BH ₂	2.09		2.09	1.98			1.91	
>BH	2.08							

Formule chimice

Compoziția chimică a substanțelor se redă prin **formule** care se clasifică în felul următor:

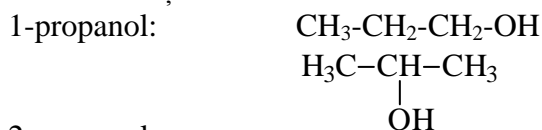
- ÷ **Formulele brute** exprimă compoziția substanței prin numărul de atomi din fiecare element în raport cu unul dintre elemente. Cunoscând masele atomice ale elementelor, se poate calcula numărul de atomi din fiecare element, în raport cu unul dintre elemente. Se împarte conținutul procentual din fiecare element la masa atomică a elementului; raporturile obținute se împart la cel mai mic dintre ele. **Exemplu.** Să se calculeze formula brută a clorurii de calciu (anhidre) știind că substanța conține 36.1% Ca și 63.9% Cl ($M_{Ca}=40.08$; $M_{Cl}=35.453$). Rezolvare:

$$\begin{aligned} \text{Ca: } & 36.1\% & \text{Cl: } & 63.9\% \\ \text{Ca: } & 36.1/40.08 = 0.90 & \text{Cl: } & 63.9/35.453 = 1.80 \\ \text{Min}(0.9, 1.80) & = 0.9; & 0.9/0.9 & = 1; & 1.8/0.9 & = 2; & \text{Ca:Cl} & = 1:2 \end{aligned}$$

Din calculele de mai sus rezultă că formula brută a clorurii de calciu este Ca_1Cl_2 sau CaCl_2 . Această formulă are următoarea semnificație: în clorura de calciu raportul dintre numărul de atomi de calciu și numărul de atomi de clor este 1:2. Exemple de formule brute: P_2O_5 (P:O = 2:5), CH (C:H = 1:1), CH_2 (C:H = 1:2), Cl_2PN (Cl:P:N = 2:1:1).

- ÷ **Formulele moleculare** redau numărul de atomi ai fiecărui element cuprinși într-o moleculă, atunci când se cunoaște masa moleculară a substanței. Formula moleculară se poate stabili experimental obținând formula brută și masa moleculară. Formula moleculară poate coincide cu formula brută sau poate fi multiplu întreg al acesteia. **Exemplu.** Pentru clorura de calciu de mai sus (Ca:Cl = 1:2) s-a obținut experimental o masă moleculară de 111. Să se exprime formula moleculară. Rezolvare: $M_{(\text{CaCl}_2)_n} = n \cdot (40.08 + 2 \cdot 35.453) = n \cdot 110.986 = 111 \rightarrow n = 0.99987 \approx 1 \rightarrow$ formula moleculară: CaCl_2 . Exemple de formule moleculare: P_4O_{10} ($(\text{P}_2\text{O}_5)_2$), C_2H_2 ($(\text{CH})_2$), C_6H_6 ($(\text{CH})_6$), $\text{Cl}_6\text{P}_3\text{N}_3$ ($(\text{Cl}_2\text{PN})_3$).

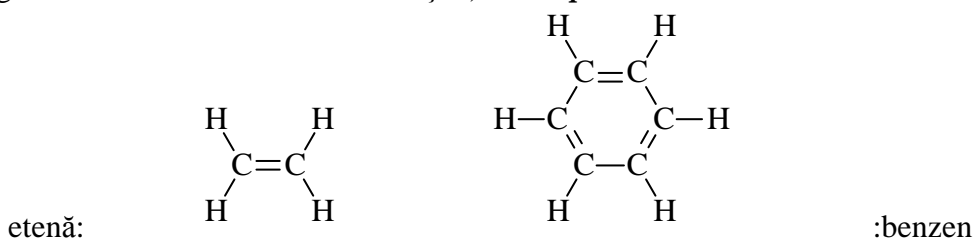
- ÷ **Formulele raționale** exprimă grupele structurale din moleculă (mai ales la compușii organici). **Exemplu.** Formulele raționale ale formulei moleculare $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$.



2-propanol:



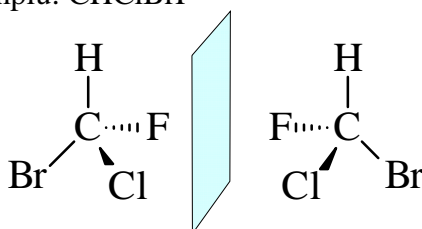
- ÷ **Formulele structurale** redau structura moleculelor (toți atomii ce compun molecula împreună cu toate legăturile care se stabilesc între aceștia). **Exemplu:**



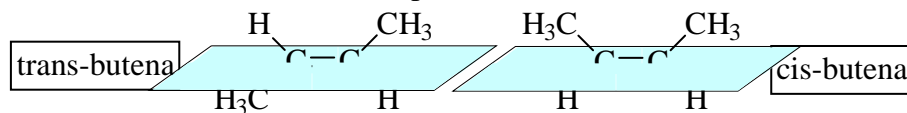
- ÷ **Izomeri de structură.** Doi sau mai mulți compuși sunt izomeri de structură când au aceeași formulă moleculară și au formule structurale diferite. **Exemple.** 1-propanol, 2-propanol și metil etil eter sunt izomeri de structură (vezi exemplul de mai sus). Nonanul (C_9H_{20}) are 35 de izomeri (http://ph.academicdirect.org/CCPNI_2007.pdf).

- ÷ **Izomeri de geometrie.** Doi sau mai mulți compuși sunt izomeri de geometrie când au aceeași formulă structurală și au geometrii diferite. Tipuri de izomeri de structură (clasificare):

- Enantiomeri; exemplu: CHClBrF



- Diastereoizomeri:
 - Izomeri cis-trans; exemplu:



- Conformeri; exemplu - butan "Gauche g-" & "Gauche g+"
 - Rotameri: exemplu - butan "Anti"

